



TITLE:

HOPG基板上における分子配列のモデリング

AUTHOR(S):

松田, 建児

CITATION:

松田, 建児. HOPG基板上における分子配列のモデリング. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2019, 2018: 51-51

ISSUE DATE:

2019-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/241178>

RIGHT:

HOPG 基板上における分子配列のモデリング
Model study of molecular ordering on the HOPG surface

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 松田 建児

研究成果概要

協同的な自己組織化プロセスを制御することで、外部刺激に対して高感度な応答を示す超分子システムの構築が可能となる。

本研究では、芳香環コア部や、コア部と長鎖アルキル基を繋ぐリンカー部位の分子構造が、二次元界面における核生成-伸長プロセスに与える影響について詳細な検討を行った (Figure 1)。その結果、水素結合をもたないエステル誘導体でも高い協同性を示すことが分かった。伸長プロセスのギブスエネルギー変化はコアが大きくなると大きくなることも分かった。

Materials Studio を用いた分子力学計算により、エステル誘導体の分子配列では、エステル同士の相互作用が見られた (Figure 2)。

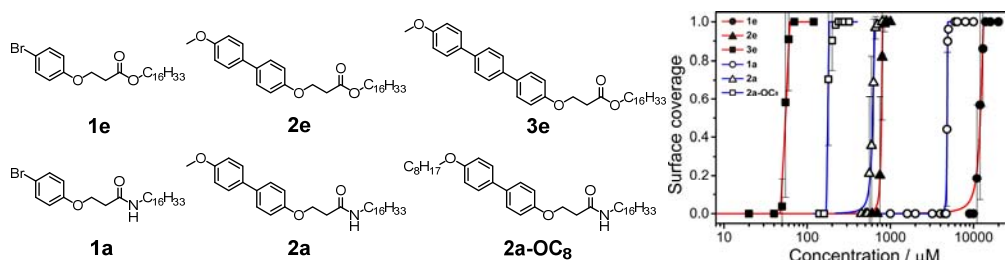


Figure 1. (a) Chemical structures of compounds **1e–3e** bearing an ester group and **1a–2a–OC8** bearing an amide group. (b) Concentration dependence of surface coverage at the octanoic acid/HOPG interface.

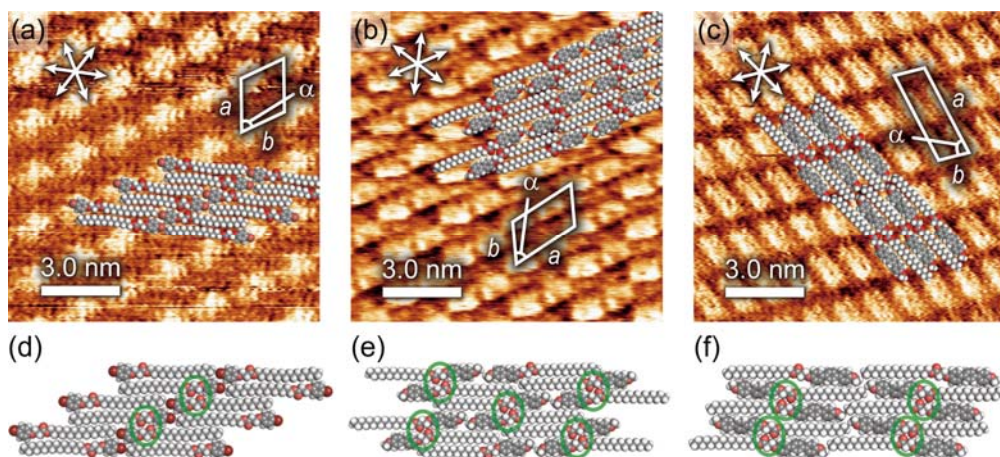


Figure 2. High-resolution STM images and molecular models of the ordering of (a) **1e**, (b) **2e**, and (c) **3e** at the octanoic acid/HOPG interface. Molecular models of the orderings of (d) **1e**, (e) **2e**, and (f) **3e** simulated by MM/MD calculations.

発表論文(謝辞なし)

1. N. Nishitani, T. Hirose, K. Matsuda, *Chem. Lett.* **2019**, 48, 253–256.